

РАСЧЕТ КРИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДЛЯ ФРАНЦИЯ

Андреева Я.А., Лаврентьева О.В., Гаркушин И.К.

Самарский государственный технический университет, г. Самара, Россия

E-mail: andreevayaa2505@gmail.com

CALCULATION OF CRITICAL PROPERTIES FOR FRANCIUM

Andreeva Yana.A., Lavrentyeva O.V., Garkushin I.K.

Samara State Technical University, Samara, Russia

The use of semi-empirical and empirical dependencies in many cases allows us to solve problems associated with great experimental difficulties. Analytical and graphical dependencies of the critical properties (pressure, volume, temperature and density) of alkali metals on their order numbers are considered. The dependencies obtained are used to calculate these properties for francium. Karapetyan's comparative methods and Mendeleev's method were applied for the description.

Важное значение в современных условиях уделяется методам расчета, прогнозирования и моделирования свойств элементов, простых веществ, соединений и смесей соединений в однотипных рядах, а также взаимосвязь элементов, простых веществ и соединений между собой. Применение полуэмпирических и эмпирических зависимостей во многих случаях позволяет решить задачи, связанные с большими экспериментальными трудностями, обусловленными нестойкостью, токсичностью, агрессивностью и так далее исследуемых веществ. Приближенные соотношения позволяют расширить базу данных по свойствам различных веществ и выявить новые зависимости, что способствует развитию теории, позволяя глубже проникнуть в теорию строения вещества, в сущность химических превращений.

Рассмотрены аналитические и графические зависимости критических свойств (давления, объема, температуры и плотности) щелочных металлов от их порядковых номеров с помощью пакетов программ Table Curve 2D производства фирмы Jandel scientificTM и Microsoft Excel для Windows 98 производства фирмы Microsoft CorporationTM. По полученным зависимостям выполнен расчет этих свойств для франция. Кроме указанных вариантов, рассчитаны критические свойства по методу Д.И. Менделеева.

В результате проведенного исследования построены полулогарифмические зависимости с максимальным коэффициентом корреляции и минимальным значением среднеквадратичного отклонения. Пример такой зависимости приведен на рис. 1 [1].

По зависимостям «свойство – порядковый номер s^1 -элемента» минимальному среднеквадратичному отклонению и максимальному коэффициенту корреляции удовлетворяют числовые значения свойств для франция: $P_{кр} = 9,12$ МПа; $T_{кр} = 2009$ К; $V_{кр} = 3.375 \cdot 10^{-4}$ м³·моль⁻¹; $\rho_{кр} = 531$ кг·м⁻³.

По уравнениям взаимосвязи «свойство 1 – свойство 2» минимальному среднеквадратичному отклонению и максимальному коэффициенту корреляции удовлетворяют числовые значения свойств для франция:

$$P_{\text{кр}} = 10,34 \text{ МПа}; V_{\text{кр}} = 3,296 \cdot 10^{-4} \text{ м}^3 \cdot \text{моль}^{-1}.$$

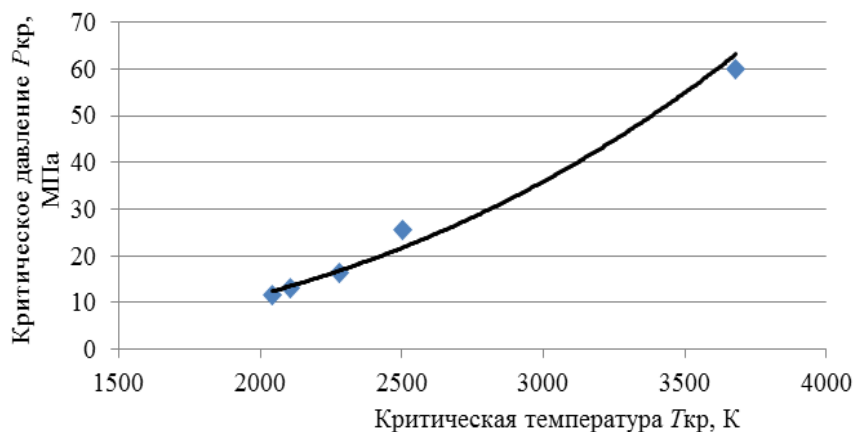


Рис. 1. Графическая взаимосвязь $P_{\text{кр}}-T_{\text{кр}}$ щелочных металлов.

По методу Д.И. Менделеева для франция получены следующие числовые значения: $P_{\text{кр}} = 10.2 \text{ МПа}$; $T_{\text{кр}} = 1098 \text{ К}$; $V_{\text{кр}} = 3.72 \cdot 10^{-4} \text{ м}^3 \cdot \text{моль}^{-1}$; $\rho_{\text{кр}} = 513 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$.

1. Гаркушин И.К., Лаврентьева О.В., Андреева Я. А., Бутлеровские сообщения, 58, 4 (2017).